

真实气体非定常波系交互作用求解方法

李陌晗, 代玉强*, 张德聪, 俞宁

(大连理工大学 化工学院, 辽宁 大连 116024)

摘要: 真实气体气波相互作用效应在气波类机械的设计中至关重要,波系之间的相交反射直接影响设备的工作过程.目前由于真实气体非定常波系理论较为匮乏,设计者不得不先采用理想气体模型进行初步估计,然后利用计算流体力学(CFD)进行校正,消耗了大量的计算资源和时间.为此建立了真实气体非定常波交互作用求解方法.首先给出了跨越单一波的计算方法,对于激波采用 Rankin-Hugoniot 关系迭代波后温度,对于膨胀波利用 Simpson 公式对黎曼不变量进行数值积分求解波后气流速度.随后给出了简单波与激波的相遇、反射等作用的计算方法.计算结果与 CFD 模拟的压力和温度具有较好的一致性,并且在计算时间上比 CFD 有明显的优势.

关键词: 真实气体;激波;膨胀波;非定常流动

中图分类号: TQ051.1

文献标识码: A

doi: 10.7511/dllgxb202304003

0 引言

由于分子体积和分子间相互作用力的影响不可忽略,可压缩流体在高压或低温下的流动总是表现出与理想气体偏离的行为,如超声速流、超临界流等^[1],某些情况下甚至出现反常流动的行为^[2].在此类工况下工作的设备,若采用理想气体状态方程设计参数,设备工作点会有偏差,严重的可能带来安全隐患^[3-5].对于真实气体的计算,最早由范德华根据分子运动理论,在理想气体状态方程的基础上引入体积修正项与分子引力修正项,提出了两参数立方型的范德华方程,但此方程计算离液态较近的气体时误差较大. Redlich 和 Kwong 通过修正分子引力项提出了 R-K 方程^[6],R-K 方程对于气液相平衡和混合物计算准确,但无法计算流体的临界态.此后在 R-K 方程基础上又出现了更准确的 S-R-K 方程^[7]、P-R 方程^[8],以及分别计算天然气与水的 AGA8 方程与 IAPWS-IF97 方程等^[9-10].目前,关于真实气体不涉及运动

波系的定常流动问题,在设备设计和性能预测方面已有较为成熟的理论方法^[11-12].然而针对波转子等工作原理为非定常波动过程(如激波与简单波的相遇、反射等)的气波设备,近年来研究较少.当遇到这类设备的设计问题,工程师通常需要使用理想气体公式进行初步估计,然后利用商业软件进行 CFD 模拟修正.但由于波转子的非定常特性,CFD 模拟时需使用周期性边界条件及滑移网格,运算过程缓慢,周期长^[13];且 CFD 波系匹配困难,工程师往往需要按照初始波图,根据压力波系粗略调节波转子端口尺寸后重新模拟,从初始模拟至最终优化结束需反复调整.如此将浪费巨大的计算资源和时间,严重影响生产实验进程.因此,开发一种真实气体波转子的算法成为工程上急需攻克的难题,而对波转子设备设计最关键的问题是完成其通道内气波交互作用的求解.本文提出一种基于任意热力学方程的真实气体一维非定常波相互作用效应的通解方法,并建立双膜激波管模型模拟反向运动激波相遇问题,与 CFD 进行对比,验证算法的准确性.

收稿日期: 2022-04-06; 修回日期: 2023-03-09.

基金项目: 国家重点研发计划资助项目(2018YFA0704602);国家自然科学基金资助项目(51476015,51106017).

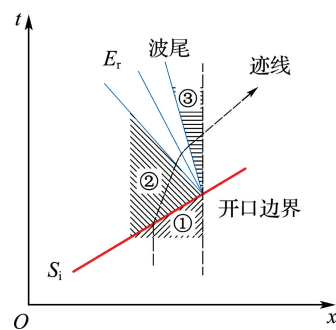
作者简介: 李陌晗(1997—),男,硕士生,E-mail:553964959@qq.com;代玉强*(1977—),男,博士,硕士生导师,E-mail:daiyuqiang@dlut.edu.cn.

1 真实气体非定常波系交互作用过程

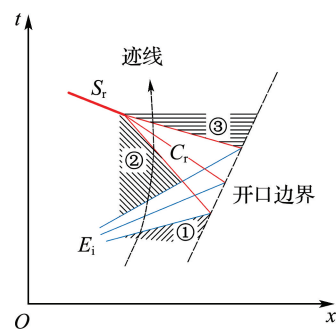
流场中扰动区与未扰动区的分界面称为扰动波. 扰动波根据气流参数是否连续可分为弱间断面(简单波)或强间断面(激波). 气波设备通常利用这些波的相互作用效应工作, 如简单波(如膨胀波和压缩波等)之间的相遇、相交、反射和折射过程, 以及激波和接触面等强间断过程, 还包括各种波在壁面或开口端的反射. 在波系交互作用规律上, 常规真实气体与理想气体定性分析并无差异. 对于简单波, 当在静止壁面或垂直于波的运动方向上移动壁面反射时, 其反射波与入射波的类型相同; 当在开口端反射时, 其反射波与入射波的类型相反. 当激波反射在固定壁面或垂直方向移动的壁面, 其反射规则与简单波相同, 但当反射在开口端, 其反射波的类型取决于波前和波后气流马赫数. 当波前气流马赫数大于1时, 反射波无法向上游传播, 只在下游产生复杂的三维流动. 当波前气流马赫数小于1时, 反射波的类型取决于波后气流马赫数, 如果波后气流马赫数小于1则反射为膨胀波, 否则没有反射波^[14]. 当两个简单波以相反的方向相交时, 它们的折射波与入射波的类型相同. 当压缩波与另一个压缩波同向运动时, 它们会叠加成一个更强烈的压缩波或激波. 膨胀波与压缩波均无法追上同向运行的膨胀波. 当膨胀波追逐压缩波时, 它们会被彼此削弱, 最终较弱的消失. 当两种不同强度的激波在相反的方向相交时, 会折射为相反方向运行的激波和一个接触面; 两激波同向而行时, 后面的激波最终会追上前者并合并成一道更强的激波, 同时产生反射波, 反射波的种类与流体的热力学状态有关. 为了得到上述真实气体波的相互作用规律, 必须根据扰动波将流场划分为波前波后, 逐个区域求解.

1.1 波在开口端的反射

对于波的开口端反射问题, 通常设定工况为波两侧气流马赫数均小于1, 否则无反射波或反射波不能全部进入上游, 无法完成气波设备的工作过程. 模型如图1所示(简单波以膨胀波为例), 其中 S 为激波, E 为膨胀波, C 为压缩波. 通常已知波前①区参数和入射波波后②区压力, 求出②区、③区全部参数. 其核心问题为根据波前气流参数及波后压力求出波两侧全部参数.



(a) 激波



(b) 膨胀波

图1 激波与膨胀波在开口端的反射

Fig. 1 The reflection of shock wave and expansion wave on a free boundary

对于图1(a)所示激波开口端反射, 在波两侧建立连续性、动量和能量守恒方程:

$$\rho_1(u_1 - D) = \rho_2(u_2 - D) \quad (1)$$

$$\rho_1(u_1 - D)^2 + p_1 = \rho_2(u_2 - D)^2 + p_2 \quad (2)$$

$$e_1 + \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{1}{2}(u_1 - D)^2 = e_2 + \frac{p_2}{\rho_2} + \frac{1}{2}(u_2 - D)^2 \quad (3)$$

式中: u 为气流速度, ρ 为密度, p 为压力, e 为热力学能, D 为激波的绝对速度. 由于3个方程中均含有未知变量 D , 计算时无法化简, 通常使用 Rankin-Hugoniot (R-H) 关系解决真实气体激波问题:

$$e_1 - e_2 = \frac{1}{2}(p_1 + p_2)(v_1 - v_2) \quad (4)$$

其中 $v = 1/\rho$, 为比容. 通常先假设波后气流温度 T_2 . 对于单相系统, 在给定组分条件下, 确定两个状态参数则系统状态确定. 根据 $e_2 = e(z_2, p_2, T_2)$, z 为与流体组分有关值(如各组分物质的量分数), 由于波在同一区域传播, 流体组分不发生改变, 即 $z_1 = z_2 = z_3$. 代入 R-H 关系可求出 v_2 ; 再利用所求 v_2 求出 $T_2 = T(z_2, e_2, v_2)$; 再次计算 e_2 、

v_2, T_2 , 直到两次计算所得 T_2 误差较小.

根据式(1)和(2)可以推出:

$$\frac{p_2 - p_1}{v_2 - v_1} = -\rho_1^2 (u_1 - D)^2 = -\rho_2^2 (u_2 - D)^2 \quad (5)$$

则右传激波的绝对速度为

$$D = u_1 + \sqrt{\frac{\rho_2}{\rho_1} \frac{p_2 - p_1}{\rho_2 - \rho_1}} \quad (6)$$

波后气流速度为

$$u_2 = \frac{\rho_1}{\rho_2} (u_1 - D) + D \quad (7)$$

对于激波的开口端反射, 反射波为膨胀波, 且③区压力等于出口背压, 则已知膨胀波前所有参数及波后压力.

将左传简单波作为参考坐标时, 可得到动量方程:

$$dp + \rho_1 c_1 du = 0 \quad (8)$$

其中 c 为简单波波速(声速), 将其积分即可得左传波黎曼不变量 J_+ :

$$J_+ = u_1 + \int \frac{dp}{\rho_1 c_1} \quad (9)$$

对于理想气体, 代入等熵关系 $p/\rho^\gamma = \text{常数}$, 可以得到熟知的积分形式的左传波黎曼不变量:

$$J_+ = u_1 + \frac{2}{\gamma - 1} c_1 \quad (10)$$

其中 γ 是绝热指数. 但对于真实气体状态方程, J_+ 没有明确的积分形式, 因此采用数值积分的方法计算. 等熵流动下, 真实气体是正压流体, 密度和声速是压力的单值函数. 所以黎曼不变量的积分形式为

$$J_+ = u_1 + \int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{\rho(z_1, p, s_1) c(z_1, p, s_1)} dp \quad (11)$$

其中 s_1 是波前气流的熵, $s_1 = s(z_1, p_1, T_1)$. 为了数值积分求出黎曼不变量, 可以使用 3 点的 Newton-Cotes 公式(Simpson 公式)^[15]:

$$\begin{aligned} \int_{p_1}^{p_2} \frac{1}{\rho(p) c(p)} dp \approx & \frac{p_2 - p_1}{6n} \left[\frac{1}{\rho(p_1) c(p_1)} + \right. \\ & 4 \sum_{i=1}^n \frac{1}{\rho(p_{i-\frac{1}{2}}) c(p_{i-\frac{1}{2}})} + \\ & 2 \sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{\rho(p_i) c(p_i)} + \\ & \left. \frac{1}{\rho(p_2) c(p_2)} \right] \quad (12) \end{aligned}$$

其中 $\rho(p) = \rho(z_1, p, s_1)$, $c(p) = c(z_1, p, s_1)$, 则波后气流速度为

$$u_2 = u_1 + \int_{p_2}^{p_1} \frac{1}{\rho(z_1, p, s_1) c(z_1, p, s_1)} dp \quad (13)$$

根据 $s_2 = s_1$, 波后温度 T_2 、热力学能 e_2 、焓 h_2 均可求出. 则激波开口端反射过程全部参数已求出.

对于图 1(b)所示膨胀波开口端反射, 先采用简单波关系计算②区参数, 而后根据反射激波关系求解③区参数, 方法同上.

1.2 波在壁面的反射

波转子设备工作时, 转子通道与压力端口周期性连通, 当激波运动至通道终点而端口未开启时则会发生壁面反射, 壁面的压强会进一步提高, 远大于入射波后的压强. 对于膨胀波反射则状态相反. 波在壁面的反射模型如图 2 所示, 壁面可以固定或低速运动, 则反射波为运动方向相反的同类性质波. 已知波前①区参数和入射波波后②区压力, 求出②区、③区全部参数.

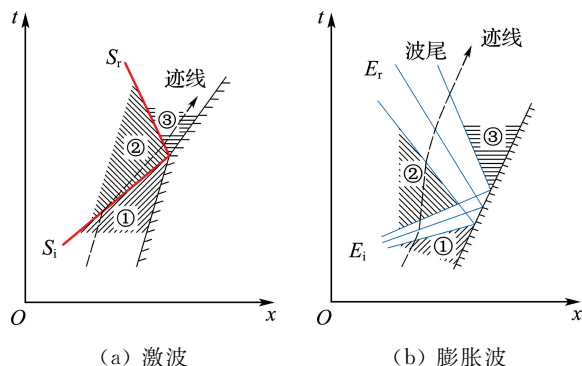


图 2 激波与膨胀波在壁面的反射

Fig. 2 The reflection of shock wave and expansion wave on a wall

对于壁面反射问题, ②区参数的求解同开口端反射; 但此时③区压力未知, ③区气流速度与壁面相同. 求解时可先假设初始③区压力, 根据波两侧关系求出③区气流速度, 并与壁面速度比较, 根据比较结果重新调整③区压力初始值计算, 直到所求气流速度与壁面速度误差达到计算要求. 波的壁面反射(以激波为例)求解方法如图 3 所示, 其中 ϵ 为计算精度, 如 1×10^{-6} .

1.3 激波相遇或追赶

激波相向或同向而行后相遇的情形, 如图 4 所示. 一般两个激波的强度不同, 所以在激波相遇后会产生一个接触面, 同时产生折射波. 接触面两

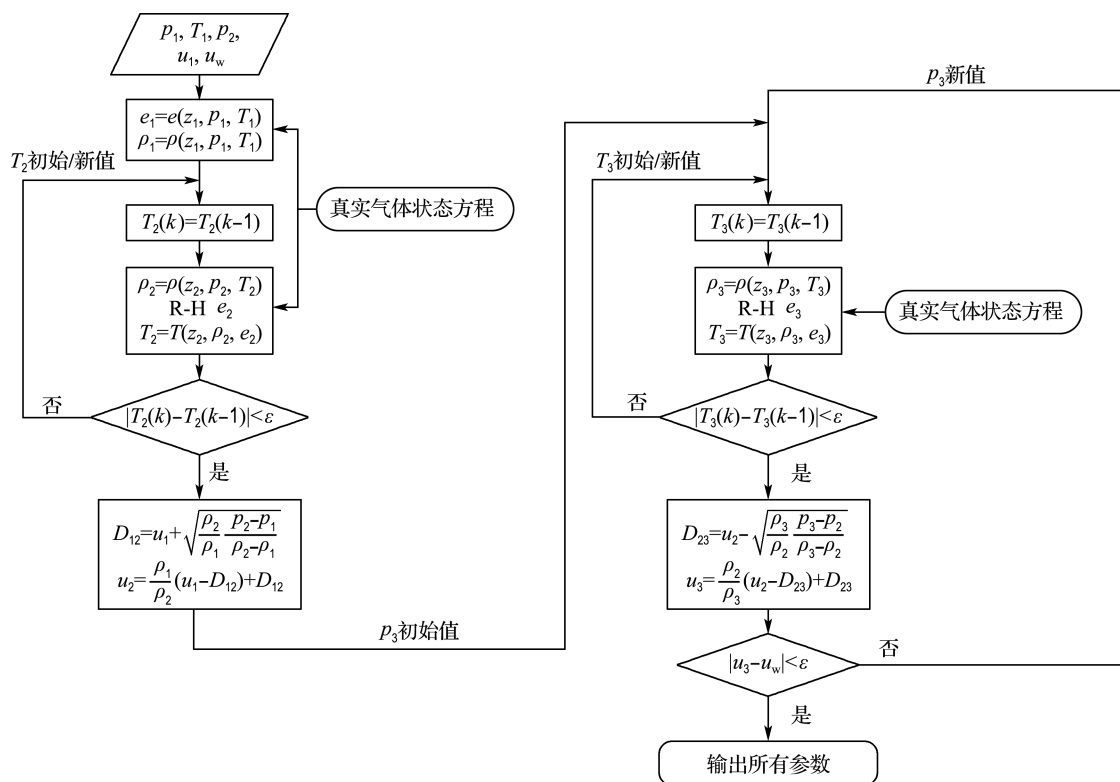


图3 波的壁面反射算法流程图

Fig. 3 Algorithm flow chart of waves reflecting on a wall

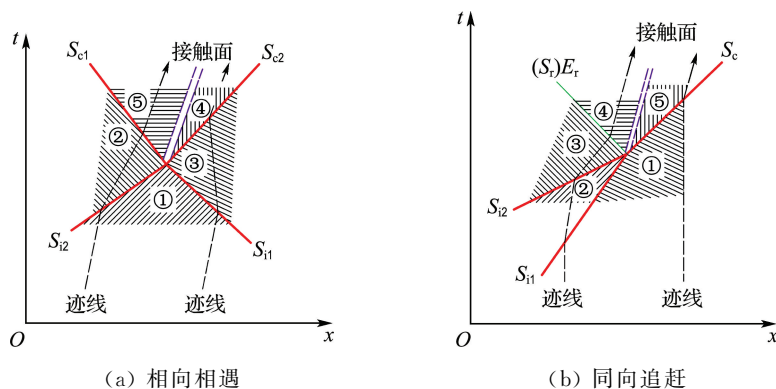


图4 两个激波相向相遇与同向追赶

Fig. 4 Two shock waves intersecting from the opposite directions and chasing in the same direction

侧流体组分、压力、速度相同,但温度、密度、声速、熵不同.对于此类问题,通常给定两个入射波的波前①区的参数和两个波后的压力,求出②区、③区其他参数,以及④区和⑤区的解.

无论是相向相遇还是同向追赶,都可以首先利用跨越激波两侧关系得到②区和③区的所有参数,然后假定初始的 p_4 或 p_5 ,求出④区或⑤区的参数.再根据 $p_4=p_5$,利用激波或简单波关系(对

于理想气体当 $\gamma \leq 5/3$ 时反射波为膨胀波,当 $\gamma > 5/3$ 时反射波为激波^[16];计算真实气体时可以先假定反射波为膨胀波,计算出⑤区压力大于③区压力则反射波为激波),求出接触面另一侧的所有参数,根据接触面两侧速度情况对初始压力进行校正,重新计算直到④区速度与⑤区速度相等,得到④区和⑤区的精确压力.激波相遇模型求解方法(以相向相遇为例)如图5所示.

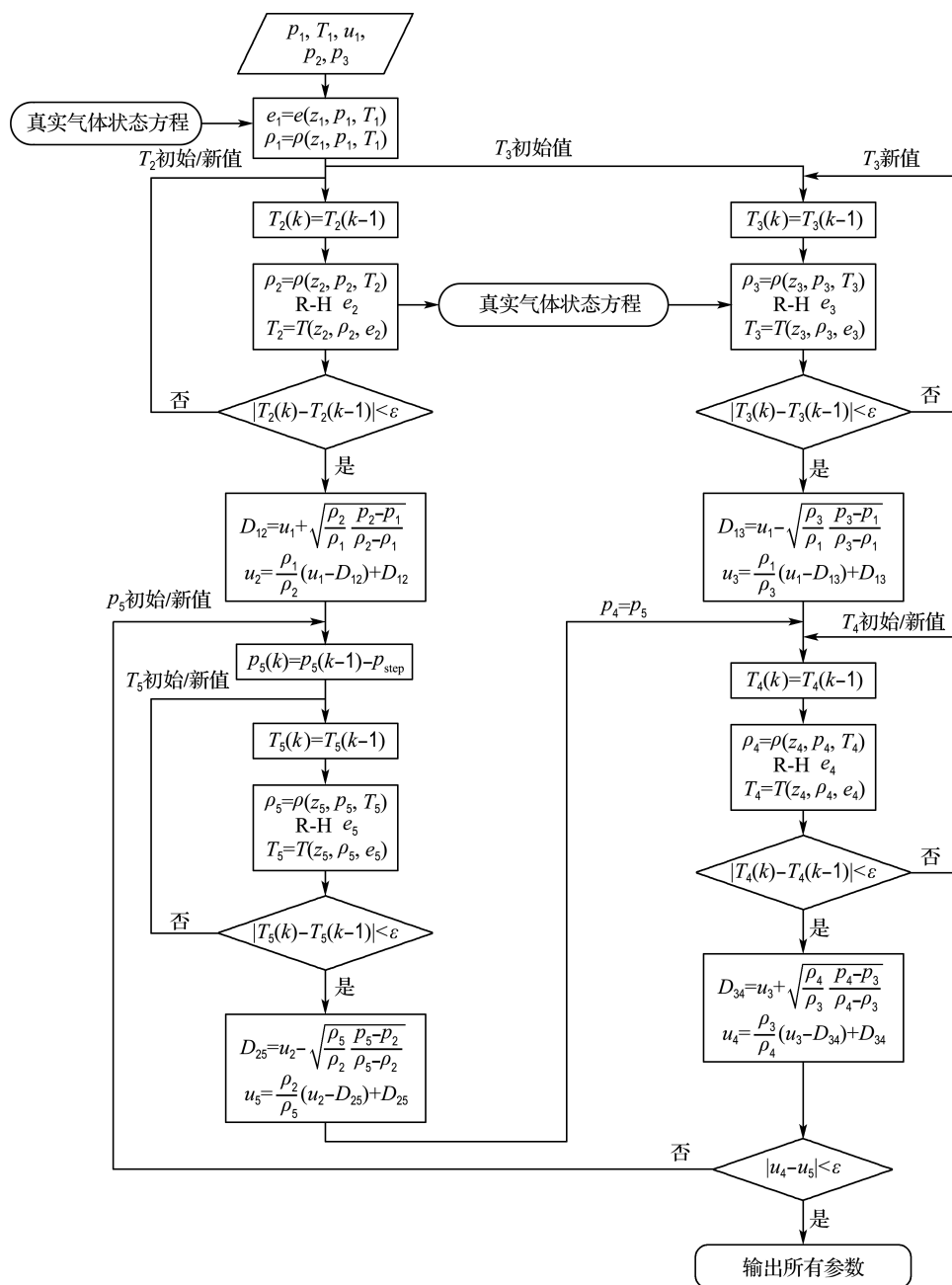


图 5 激波相向相遇算法流程图

Fig. 5 Algorithm flow chart of shock waves intersecting from the opposite directions

2 算法结果与 CFD 对比分析

为验证算法精度,采用 CFD 模拟相向运动激波相遇情况,构建含双膜的激波管模型,如图 6 所示.采用 R23 流体.激波管内部被分为 3 个室,3 室初始条件分别为 HP:1 000 kPa, 550 K; MP: 400 kPa, 250 K; LP: 25 kPa, 200 K. 计算时采用 Spalart-Allmaras(S-A)湍流模型和 AUSM 方法^[17].

零时刻破膜后 LP 室向 HP、MP 室传播两组膨胀波 E_1 、 E_2 , 而 HP、MP 室则分别向 LP 室传播



图 6 CFD 模拟双膜激波管初始压力状态

Fig. 6 Initial pressure state of double-diaphragm shock tube by CFD simulation

相向运动的激波 S_{i1} 、 S_{i2} . 激波相遇后压力与温度的波图如图 7 所示(由于激波管中同时存在激波与膨胀波系,取两相向激波相遇过程模型波图如图 7(b)中白色粗实线内区域),①区分别在 S_{i2} 、

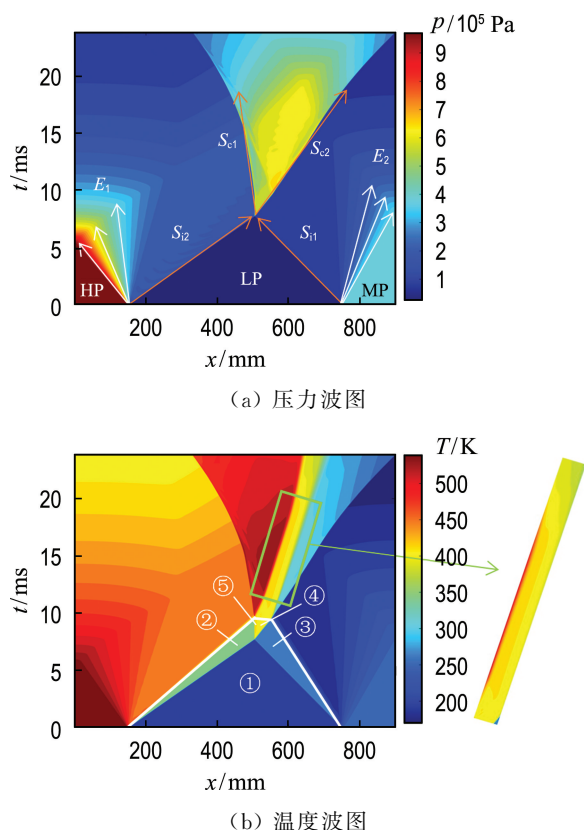


图7 CFD模拟激波相遇后压力与温度波图

Fig. 7 The wave diagram of pressure and temperature after shock waves intersecting by CFD simulation

S_{11} 作用下压力、温度升高,形成②、③区,且右行激波相比左行激波强度更强.两入射激波 S_{11} 、 S_{12} 相遇后互相穿过,形成两相反方向的折射激波 S_{c1} 、 S_{c2} ,使②区与③区内压力与温度进一步提高,形成⑤、④区.在激波相遇后流体间存在明显的接触面,如图7(b)放大图中深浅色分界面所示.

图8显示了由真实气体激波相遇算法计算出的温度和压力结果与CFD模拟结果的比较.CFD

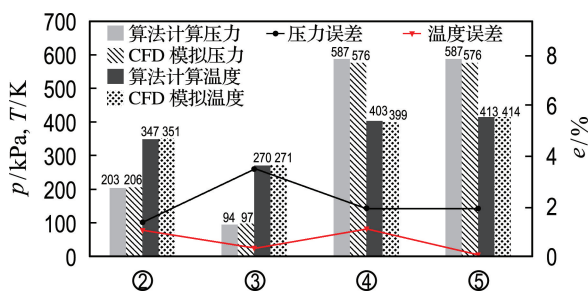


图8 CFD模拟与算法计算的压力与温度对比

Fig. 8 Comparison of pressure and temperature obtained by CFD simulation and algorithm calculation

与算法结果在激波管内各区域压力和温度几乎没有差异(包括相遇前的②、③区,相遇后的④、⑤区),最大误差不超过4%(以CFD模拟结果为基准).且算法与CFD相比在计算时间上有数量级的优势,可作为设备设计的初步计算工具.

3 结 论

(1)本文提出了一种基于热力学函数库的跨真实气体波的求解方法.对跨越运动激波来说,热力学状态参数突变,没有显式关系可以使用,波两侧气流参数必须通过控制方程迭代计算得出,计算时使用描述热力学能关系的Rankin-Hugoniot关系可以跳过未知变量激波波速,从而简化计算.当计算跨简单波过程时,由于流动为等熵过程,流体表现为正压流体,因此可以通过数值积分(如Simpson公式)求解跨简单波的黎曼不变量问题计算波后气流速度.

(2)通过分析波的壁面和开口端反射以及激波的相遇或追赶模型,给出了详细的波系交互作用的计算方法,为真实气体波转子算法的开发提供了重要的设计思路.为验证算法的准确性,选取激波相遇问题进行CFD模拟.通过与CFD对比发现,算法的计算结果与CFD各区温度、压力误差极小(均小于4%),且在计算时间上与CFD相比有显著优势,因此波系交互作用算法有着良好的应用前景.

参考文献:

- [1] RINALDI E, PECNIK R, COLONNA P. Exact Jacobians for implicit Navier-Stokes simulations of equilibrium real gas flows [J]. *Journal of Computational Physics*, 2014, **270**: 459-477.
- [2] COLONNA P, GUARDONE A, NANNAN N R. Siloxanes: A new class of candidate Bethe-Zel'dovich-Thompson fluids [J]. *Physics of Fluids*, 2007, **19**(8): 086102.
- [3] BALTADJIEV N D, LETTIERI C, SPAKOVSKY Z S. An investigation of real gas effects in supercritical CO_2 centrifugal compressors [J]. *Journal of Turbomachinery*, 2015, **137**(9): 091003.
- [4] YANG Yan, WEN Chuang, WANG Shuli, et al. Numerical simulation of real gas flows in natural gas supersonic separation processing [J]. *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 2014, **21**: 829-836.
- [5] 刘 赫, 张易阳, 吴莘馨, 等. 基于真实气体模型的安全阀流场数值模拟 [J]. *阀门*, 2016(4): 14-17.

- LIU He, ZHANG Yiyang, WU Xinxin, *et al.*. Numerical simulation of safety valve flow based on real gas model [J]. **Valve**, 2016(4): 14-17. (in Chinese)
- [6] REDLICH O, KWONG J N S. On the thermodynamics of solutions. V. An equation of state. Fugacities of gaseous solutions [J]. **Chemical Reviews**, 1949, **44**(1): 233-244.
- [7] SOAVE G. Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state [J]. **Chemical Engineering Science**, 1972, **27**(6): 1197-1203.
- [8] PENG D Y, ROBINSON D B. A new two-constant equation of state [J]. **Industrial and Engineering Chemistry Fundamentals**, 1976, **15**(1): 59-64.
- [9] FARZANEH-GORD M, MOHSENI-GHARYEHSABA B, TOIKKA A, *et al.*. Sensitivity of natural gas flow measurement to AGA8 or GERG2008 equation of state utilization [J]. **Journal of Natural Gas Science and Engineering**, 2018, **57**: 305-321.
- [10] WAGNER W, COOPER J R, DITTMANN A, *et al.*. The IAPWS industrial formulation 1997 for the thermodynamic properties of water and steam [J]. **Journal of Engineering for Gas Turbines and Power**, 2000, **122**(1): 150-180.
- [11] ZEGENHAGEN M T, ZIEGLER F. A one-dimensional model of a jet-ejector in critical double choking operation with R134a as a refrigerant including real gas effects [J]. **International Journal of Refrigeration**, 2015, **55**: 72-84.
- [12] SZOPLIK J. The steady-state simulations for gas flow in a pipeline network [J]. **Chemical Engineering Transactions**, 2010, **21**: 1459-1464.
- [13] 朱景平. 气波增压强化自复叠制冷系统研究 [D]. 大连: 大连理工大学, 2021.
- ZHU Jingping. The study on auto-cascade refrigeration system supercharged by gas wave [D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2021. (in Chinese)
- [14] 张连玉, 汪令羽, 苗瑞生. 爆炸气体动力学基础 [M]. 北京: 北京工业学院出版社, 1987.
- ZHANG Lianyu, WANG Lingyu, MIAO Ruisheng. **Basics of Explosive Gas Dynamics** [M]. Beijing: Beijing Institute of Technology Press, 1987. (in Chinese)
- [15] SERMUTLU E. Comparison of Newton-Cotes and Gaussian methods of quadrature [J]. **Applied Mathematics and Computation**, 2005, **171**(2): 1048-1057.
- [16] 周毓麟. 一维非定常流体力学 [M]. 北京: 科学出版社, 1990.
- ZHOU Yulin. **One-Dimensional Unsteady Fluid Mechanics** [M]. Beijing: Science Press, 1990. (in Chinese)
- [17] LIOU M S. A sequel to AUSM: AUSM⁺ [J]. **Journal of Computational Physics**, 1996, **129**(2): 364-382.

Solution method of real gas unsteady waves' interactions

LI Mohan, DAI Yuqiang*, ZHANG Decong, YU Ning

(School of Chemical Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

Abstract: The real gas waves' interaction effects are important in the design of wave machines, and the intersecting reflection between waves directly affects the working process of the equipment. At present, due to the lack of real gas unsteady wave theory, designers have to use the ideal gas model to make a preliminary estimate, and then make a correction by means of computational fluid dynamics (CFD) which consumes tremendous computing resources and time. Therefore, a solution method of the real gas unsteady waves' interactions is built. Firstly, the calculation method for single wave crossing is presented. For shock waves, the Rankin-Hugoniot relationship is used to iterate the temperature behind the wave. For expansion waves, the Simpson formula is used to numerically integrate the Riemann invariant to solve the gas velocity behind the wave. Then, the calculation methods are provided for the interactions like encountering and reflecting processes among the simple waves and shock waves. The pressure and temperature comparisons between the results of calculation method and CFD simulation show the good consistency, and the proposed method has a clear superiority to CFD in time consuming.

Key words: real gas; shock wave; expansion wave; unsteady flow